*Письма в ЖЭТФ, том 27, вып.5, стр. 255 – 259*  *5 марта 1978 г.*

# КРИТИЧЕСКИЕ ФЛУКТУАЦИИ И РАСЩЕПЛЕНИЕ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА В ТЕТРАГОНАЛЬНОМ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКЕ

*А.Л. Корженевский, А.И.Соколов*

Показано, что в тетрагональном сегнетоэлектрике (ферромагнетике) типа "легкая плоскость" взаимодействие сильно развитых критических флуктуаций может привести к расщеплению непрерывного фазового перехода на два перехода первого рода, близких друг к другу по температуре.

В этой статье мы хотим обратить внимание на интересный эффект, который может наблюдаться в анизотропных системах в условиях сильно развитых критических флуктуаций. Речь идет о фазовом переходе в низкотемпературную фазу, не являющуюся энергетически наиболее выгодной с точки зрения теории Ландау, следствием чего должно быть расщепление фазового перехода на два перехода, близких друг к другу по температуре. Теория этого явления построена ниже для случая тетрагонального кристалла типа "легкая плоскость" с диполь-дипольным взаимодействием. Выбор модели обусловлен двумя причинами. Во-первых, критическая термодинамика подобных систем до сих пор не обсуждалась в литературе, несмотря на то, что известен целый ряд сегнетоэлектриков и ферромагнетиков, тетрагональных в высокотемпературной фазе. И во-вторых, задача здесь может быть решена аналитически (без обращения к ЭВМ) в отличие, скажем, от случая кубического кристалла с дипольными силами и анизотропной корреляционной функцией.

Эффективный гамильтониан поля флуктуаций поляризации $\phi(\mathbf{q})$ в тетрагональном сегнетоэлектрике (ферромагнетике) при учете лишь существенных инвариантов имеет вид

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{q}}\Big\{\sum_{\alpha=1}^{3}(\kappa_0^2 + q^2 + f q_\alpha^2 + \Lambda_t^2\,\delta_{\alpha 3})\,\phi_\alpha(\mathbf{q})\,\phi_\alpha(-\mathbf{q}) + \sum_{\alpha,\beta=1}^{2}\left[(\Lambda^2 + h\,q^2)n_\alpha\phi_\alpha(\mathbf{q})\right.$$

$$+(\Delta'^2 + h' q^2)\, n_3 \phi_3(\mathbf{q})] n_\beta \phi_\beta(-\mathbf{q}) + (\Delta''^2 + h'' q^2)\, n_3^2 \phi_3(\mathbf{q}) \phi_3(-\mathbf{q}) \Big\} + \frac{1}{4!} \sum_{\substack{\alpha\beta=1 \\ \mathbf{q}+\mathbf{q}'+\mathbf{q}''+\mathbf{q}'''=0}}^{2} \Big\{ [\gamma_2^{(0)} +$$

$$+ (\gamma_1^{(0)} - \gamma_2^{(0)}) \delta_{\alpha\beta} ] \phi_\alpha(\mathbf{q}) \phi_\alpha(\mathbf{q}') \phi_\beta(\mathbf{q}'') \phi_\beta(\mathbf{q}''') +$$

$$+ [\gamma_3^{(0)} \phi_\alpha(\mathbf{q}) \phi_\alpha(\mathbf{q}') + \frac{\gamma_4^{(0)}}{4} \phi_3(\mathbf{q}) \phi_3(\mathbf{q}')] \phi_3(\mathbf{q}'') \phi_3(\mathbf{q}''') \Big\}. \tag{1}$$

Здесь $n_\alpha = q_\alpha / q$ , "масса" $\kappa_0^2$ линейно зависит от температуры, константы $f, h, h', h''$ определяются величиной и видом пространственной дисперсии короткодействующего и диполь-дипольного потенциалов. Тетрагональная $\Delta_t$ и дипольные $\Delta$, $\Delta'$, $\Delta''$ щели в спектре флуктуаций характеризуют энергию анизотропии и энергию диполь-дипольного взаимодействия.

Известно, что в сегнетоэлектриках $\Delta, \Delta', \Delta'' \sim q_D >> |\kappa_0|$, где $q_D$ – импульс обрезания. Пусть кристаллическая анизотропия достаточно велика, т.е. $\Delta_t \sim q_D$. Тогда критическими перенормировками $\Delta, \Delta', \Delta'', \Delta_t$, которые, как и перенормировка "массы" $\kappa_0$ , имеют величину порядка $\kappa_0$, можно пренебречь. Пренебрежимо малы также перенормировки параметров дисперсии $f, h, h', h''$; они, как известно, определяются величиной $\partial \Sigma_{\alpha\beta}(0)/\partial q^2$ ($\Sigma_{\alpha\beta}(\mathbf{q})$ – массовый оператор), для которой характерна численная малость той же природы,что и малость критического индекса $\eta$ [1]. С учетом этого функция Грина $G_{\alpha\beta}(\mathbf{q})$ нашей задачи в пределе $\kappa$, $q << \Delta, \Delta', \Delta''$, $\Delta_t$ может быть представлена в виде

$$G_{\alpha\beta}(\mathbf{q},\kappa) = \frac{[(1-n_3^2)\delta_{\alpha\beta} - n_\alpha n_\beta](1-\delta_{\alpha 3})(1-\delta_{\beta 3})}{(\kappa^2+q^2)(1-n_3^2) + 2fq^2 n_1^2 n_2^2}, \tag{2}$$

где $\kappa$ – обратный радиус корреляции (перенормированная "масса").

Критическая термодинамика системы определяется видом температурных зависимостей одетых констант связи $\gamma_i = \Gamma_i(0,0,0,\kappa)$ [2, 3], где $\Gamma_i(\mathbf{q}, \mathbf{q}', \mathbf{q}'', \kappa)$ есть полные вершины. Эволюция $\gamma_i$ при изменении температуры описывается уравнениями ренормализационной группы (РГ). Рассматривая графические разложения для функций Гелл-Манна – Лоу, входящих в эти уравнения, нетрудно заметить, что при сделанных вы-

[1] Реально перенормировки $f, h: h', h''$ становятся заметными лишь в очень узкой, практически недостижимой окрестности $T_c$ [1]

ше предположениях из четырех уравнений РГ независимыми являются лишь два – для $\gamma_1$ и $\gamma_2$, а критическое поведение двух других констант связи однозначно определяется температурными зависимостями $\gamma_1$ и $\gamma_2$. Перейдем от вершин $\gamma_i$ к безразмерным инвариантным зарядам $g_i = \gamma_i/32\pi\kappa$. Тогда уравнение РГ для зарядов $g_1$, $g_2$ в трехмерном пространстве и в низшем, оптимальном в данном случае [4] приближении по $g_i$ будут иметь вид

$$\frac{dg_1}{dt} = g_1 - 9l_1g_1^2 - 6l_2g_1g_2 - l_1g_2^2 \quad ,$$

$$\frac{dg_2}{dt} = g_2 - 9l_2g_1^2 - 6l_1g_1g_2 - 9l_2g_2^2 \quad , \tag{3}$$

где

$$l_1 = \frac{1+f-\sqrt{1+f/2}}{f\sqrt{1+f/2}}, \quad l_2 = \frac{\sqrt{1+f/2}-1}{f\sqrt{1+f/2}}, \quad t = -\ln\kappa\ . \tag{4}$$

Нетрудно показать, что все особые точки системы уравнений (3) лежат на лучах $g_2 = \xi g_1$, причем $\xi$ удовлетворяет уравнению

$$(\xi-\theta)(\xi^2+3) = 0, \qquad \theta = 3l_2/l_1\ . \tag{5}$$

Таким образом, система (3) имеет одну нетривиальную особую точку $g_1^* = 1/9(l_1+\theta l_2)$, $g_2^* = \theta g_1^*$. Эта точка является седловой и при $f = 0$ лежит на "гайзенберговской" прямой $g_2 = g_1$. Картина фазовых траекторий системы (3) приведена на рис. 1. Параметр $\theta$, определяющий угол наклона сепаратрисы $g_2 = \theta g_1$, изменяется от 3 до 0 при изменении константы анизотропии спектра флуктуаций $f$ от $-2$ до $\infty$ [1]).

Мы видим, что при любых значениях затравочных констант связи эффективный гамильтониан теряет устойчивость в критичеокой области, и фазовый переход в тетрагональном сегнетоэлектрике оказывается переходом первого рода. Значительно более интересен, однако, тот факт, что структура низкотемпературной фазы при этом может отличаться от той, которая предсказывается теорией Ландау. Действительно, при $f \neq 0$ угол наклона сепаратрисы $g_2 = \theta g_1$ не равен 45° и на фазовой диаграмме существуют траектории, пересекающие "гайзенберговскую" прямую. Это значит, что возможны ситуации, когда кристалл, имеющий затравочную анизотропию констант связи "ромбического" типа, будет переходить при фазовом превращении в моноклинную фа-

1) Как видно из (2), только при значениях $f$ из интервала $(-2, \infty)$ фазовый переход будет переходом в однородную (сегнетоэлектрическую) фазу

зу или наоборот. В то же время ясно, что вдали от критической области термодинамически устойчива та фаза, которая предсказывается теорией Ландау. Отсюда следует, что с понижением температуры в кристалле должен происходить второй фазовый переход – из одной низкотемпературной фазы (неландауской) в другую. Этот переход, очевидно, должен быть переходом первого рода. Представление о топологии фазовой диаграммы тетрагонального сегнетоэлектрика в описанном случае дает рис. 2. Критические флуктуации и анизотропия дисперсии корреляционной функции приводят к появлению на этой диаграмме характерного "клюва", образованного линиями фазовых переходов первого рода.

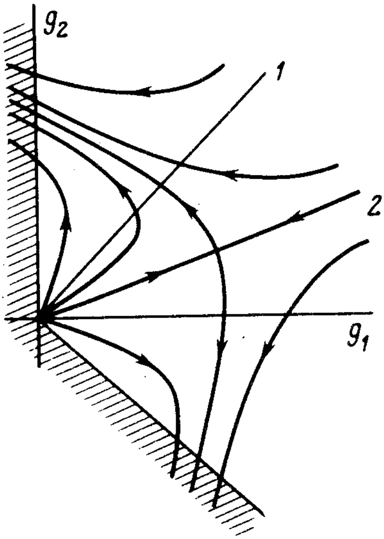


Рис. 1. Фазовые траектории системы уравнений (3). Заштрихована область неустойчивости гамильтониана (1). Цифрой *1* обозначена "гайзенберговская" прямая $g_2 = g_1$, цифрой *2* – сепаратриса $g_2 = \theta g_1$, положение сепаратрисы соответствует значению $f > 0$

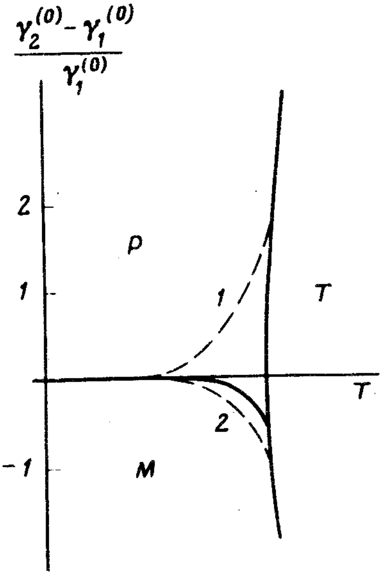


Рис. 2. Фазовая диаграмма тетрагонального сегнетоэлектрика в координатах "температура – анизотропия четырехфононного ангармонического взаимодействия". Тетрагональная ($T$), ромбическая ($P$) и моноклинная ($M$) фазы отделены друг от друга линиями фазовых переходов первого рода. Вид "клюва" соответствует наклону сепаратрисы на рис. 1, пунктиром показаны предельные положения "клюва" при $f \to -2$ (*1*) и $f \to \infty$ (*2*)

Эффект расщепления фазового перехода не специфичен для рассмотренной здесь модели. Это явление должно наблюдаться в целом ряде других случаев, когда фазовый переход первого рода происходит в условиях сильно развитых критических флуктуаций и коррелятор этих флуктуаций анизотропен при конечных $q$ . Например, в тех ферромагнетиках и антиферромагнетиках где взаимодействие флуктуаций параметра порядка приводит к изменению рода фазового перехода [5, 7], анизотропия обменного взаимодействия может вызывать расщепление этого перехода на два. В этом случае сепаратрисы в пространстве инвариантных зарядов, как и выше, не будут совпадать с линиями высокой симметрии (типа "гайзенберговской"), и на фазовых диаграммах кристаллов появятся "клювы".

Мы благодарны С.Л.Гинзбургу и С.В.Малееву за обсуждение результатов работы.

Ленинградский
электротехнический институт
им.В.И.Ульянова (Ленина)

Поступила в редакцию
25 декабря 1977 г.

## Литература

[1] T.Natterman. J. Phys., C9, 3337, 1976.

[2] А.З.Паташинский, В.Л.Покровский. УФН, 121, 55, 1977.

[3] E.Brezin, J.C.Le Guillou, J.Zinn-Justin. В книге Phase Transitions and Critical Phenomena, v.6, Academic Press, 1976.

[4] А.И.Соколов. ФТТ, 19, 747, 1977.

[5] D.Mukamel, S.Krinsky, J. Phys., C8, L496, 1975; Phys. Rev., B13, 5078, 1976.

[6] С.А.Бразовский, И.Е.Дзялошинский, Б.Г.Кухаренко. ЖЭТФ, 70, 2257, 1976.

[7] И.Е.Дзялошинский. ЖЭТФ, 72, 1930, 1977.